

01;06;12

Распределение медных нанокластеров по размерам в аморфном углероде

© Д.В. Куликов, Ю.В. Трушин, В.С. Харламов,
В.И. Иванов-Омский

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 16 июля 1998 г.

Теоретически исследовался процесс формирования нанокластеров меди в растущей пленке аморфного углерода. Осуществлено сравнение расчетных распределений медных кластеров по размерам с экспериментальными данными. Проведена численная оценка некоторых кинетических параметров меди в аморфном углероде.

Интерес к физике проводящих кластеров стимулируется их возможным применением в нано- и микро-электронике. Модификация свойств гидрогенизированного аморфного углерода ($a-C:H$) посредством внедрения металлических нанокластеров (например, медных) представляет большой интерес из-за возможности варьировать полезные свойства материала. Введение металлических нанокластеров дает также дополнительные возможности для исследования структуры самой аморфной матрицы [1,2].

В настоящей работе предлагается модель эволюции медных нанокластеров в течение роста $a-C:H$ пленок при магнетронном сораспылении графита и меди [2]. Модель используется для построения функции распределения этих кластеров по размерам, которая, как показано ниже, удовлетворительным образом согласуется с экспериментальными результатами [1,2]. Сравнение параметров модели с экспериментом позволяет численно оценить величину энергии активации поверхностной миграции меди.

Главные предположения модели следующие.

1. Численные оценки показывают, что в процессе роста пленки атомы меди и углерода попадают на поверхность пленки с малой энергией, недостаточной для проникновения в глубь образца.

2. Атомы меди могут диффундировать только по поверхности пленки, поскольку диффузия меди в объеме образца пренебрежимо мала. Таким образом, все диффузионные процессы происходят в течение роста одного или двух монослоев пленки.

3. Диффундирующие атомы меди могут образовывать бимежузлия и присоединяться к уже существующим медным кластерам, тем самым увеличивая их размер. Таким образом в пленке существуют медные кластеры различных размеров.

В соответствии с этими предположениями на основе теории диффузионных процессов в твердых телах под облучением (см., например, [3]) может быть записана система уравнений, учитывающая вышеназванные процессы:

$$\frac{\partial C(t)}{\partial t} = g - \alpha DC^2(t) - \alpha_q DC(t) \int_0^{\infty} f(R, t) R dR, \quad (1)$$

$$\frac{dV(t)}{dt} = \frac{d(\pi R^2(t))}{dt} = a^2 I(R) = a^2 \alpha_q DR(t) C(t),$$

или

$$\frac{dR(t)}{2} = \frac{a^2}{2\pi} \alpha_q DC(t), \quad (2)$$

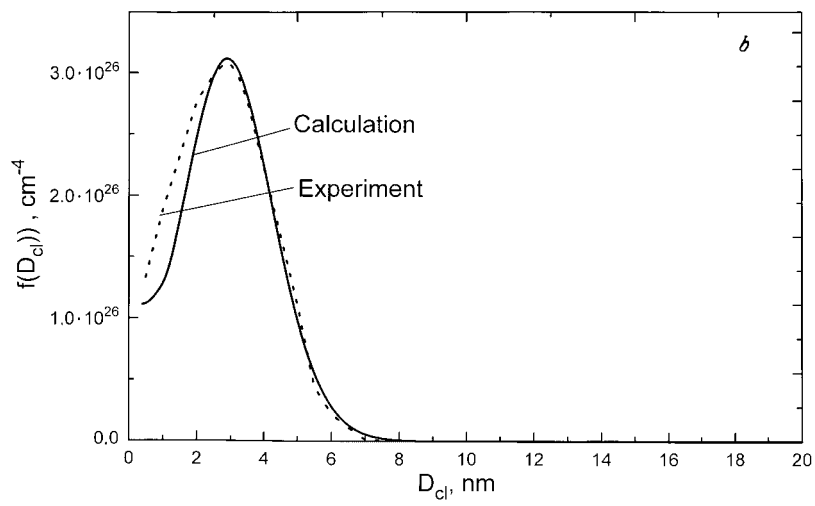
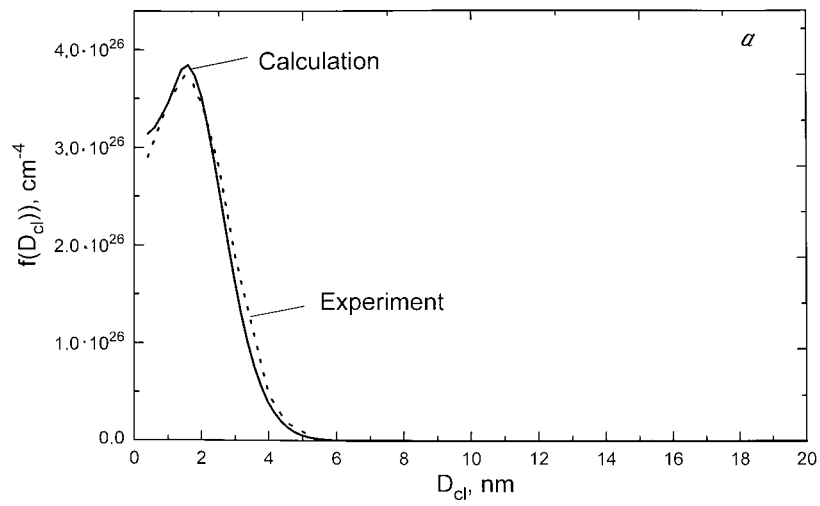
$$\frac{\partial f(R, t)}{\partial t} = W(R) - \frac{\partial}{\partial R} \left[f(R, t) \frac{dR(t)}{dt} \right]$$

$$= \frac{\alpha DC^2(t)}{2a} \Big|_{R=2a} - \frac{\partial}{\partial R} \left[f(R, t) \frac{a^2}{2\pi} \alpha_q DC(t) \right]. \quad (3)$$

Здесь $C(t)$ — поверхностная концентрация меди, g — скорость генерации меди на поверхности растущей пленки, D — коэффициент поверхностной диффузии меди,

$$D = D_0 \exp(-\varepsilon^m/kT), \quad (4)$$

ε^m — поверхностная энергия активации миграции меди, $f(R, t)$ — функция распределения медных кластеров по размерам (то есть количество кластеров данного размера в единице объема), V и R — объем (более точно, площадь, т.к. кластеры считаются плоскими) и радиус медных кластеров, a — параметр решетки меди, $I(R)$ — скорость роста кластеров меди, $W(R)$ — скорость образования кластеров размера R , α и α_q — геометрические параметры присоединения атомов меди к кластерам.



Расчетные и экспериментальные функции распределения кластеров меди по размерам в DLC-пленках с различным содержанием меди: *a* — 3%, *b* — 9%.

Система уравнений (1)–(3) решалась численно на компьютере с помощью программы MGEAR [4] с параметрами, соответствующими эксперименту [1,2]. Неизвестные величины ε^m , α и α_q варьировались в ходе расчетов. Была получена функция распределения кластеров меди по размерам для образцов с различным содержанием меди (3% и 9%, см. [1,2]), представленные на рисунках вместе с экспериментальными результатами. Видно удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных данных. Теоретические кривые получены с использованием следующих варьируемых параметров: для образца с содержанием меди 3% — $\alpha_q = 2\pi$, $\alpha = 2\pi \cdot 0.15 \text{ nm}$, $\varepsilon^m = 0.75 \text{ eV}$; а для 9% — $\alpha_q = 6\pi$, $\alpha = 6\pi \cdot 0.15 \text{ nm}$, $\varepsilon^m = 0.75 \text{ eV}$. Таким образом, геометрия формирования медных кластеров меняется при изменении содержания меди в пленке, что согласуется с данными работы [2], где наблюдается фрактальная размерность поверхности медных кластеров с содержанием меди больше 4%.

Таким образом, с помощью компьютерного моделирования получена функция распределения кластеров меди по размерам, удовлетворительно согласующаяся с экспериментом. Это обстоятельство свидетельствует об адекватности предложенной выше модели роста металлических кластеров в процесс формирования пленки аморфного углерода при магнетронном сораспылении графита и меди. Численно оценена энергия активации поверхностной миграции атомов меди.

Работа поддержана грантами РФФИ N 97–02–18110 и МНТЦ (проект № 467).

Список литературы

- [1] *Ivanov-Omskii V.I., Yastrebov S.G., Suvorova A.A., Sitnikova A.A., Tolmachev A.V.* // J. of Chemical Vapor Deposition. 1997. V. 5. P. 188–197.
- [2] *Ivanov-Omskii V.I.*, in Diamond Based Composites and Related Materials, 3. High Technology, V. 38, ed.M. Prelas et al. Kluwer Academic Publication, Netherlands. 1997. P. 171–187.
- [3] *Trushin Yu.V.* Theory of Radiation Processes in Metal Solid Solutions. Nova Science Publishers., New York, 1996, 405 p.
- [4] *Kulikov D.V., Suris R.A., Trushin Yu.V.* // Supercond. Sci. & Techn. 1995. V. 8. P. 303.